INFORMATICA



Antes:

- Dudas sobre el examen:
 - Ecuación de segundo grado
 - Sumatorios
 - Vectores
- Clase de hoy:
 - Funciones intrínsecas
 - Ejercicio polinomio de Taylor
 - Matemáticas
 - Programación



Operaciones con vectores y matrices

```
program producto matriz
integer, allocatable :: A(:,:)
integer :: i,k
allocate (A(3,5))
A = 0
k = 7
do i = 1, 3
        A(i,i)=1
enddo
A = k*A
do i = 1,3
        write(*,*) A(i,:)
enddo
end program
```

```
iRecordatorio!
```



Con esto escribimos una matriz por filas (una fila por cada valor de i)



- Son funciones predefinidas que se pueden utilizar sin declarar previamente.
- Las funciones pueden tener argumentos de tipo:
 - Númerico:
 - Conversión de tipo
 - Truncamiento
 - Redondeo
 - Matemáticas
 - Array
 - Matemáticas
 - Búsqueda
 - Dimensiones



Character

- Funciones numéricas. Conversión de tipo
 - Real(x[,k]) → convierte x a real(kind=k)
 - Tipo del argumento (x): integer, real o complex
 - Tipo de la función: real
 - dble(x) → convierte x a real*8
 - Tipo del argumento (x): integer, real o complex
 - Tipo de la función: real*8

(Los corchetes significan opcional)



• Funciones numéricas. Conversión de tipo

```
program prueba_intrinsecas
```

```
integer :: a
real(8) :: xd
real :: x
a = 2
x = real(a)
xd = real(a,KIND=8)
print*, "a", a
print*, "x", x
print*, "xd", xd
```

```
a 2
x 2.00000000
xd 2.00000000000000000
```



- Funciones numéricas. Conversión de tipo
 - aimag (z)
 Parte imaginaria del número complejo z
 - Tipo del argumento: complex
 - Tipo de la función: real
 - cmplx(x[,y][,k])
 Número complejo de parte real x e imaginaria y y kind=k
 - Tipo del argumento: real o complex
 - Tipo de la función: complex



• Funciones numéricas. Conversión de tipo

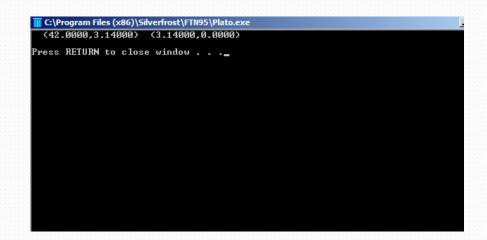
```
real :: x \rightarrow cmplx(x) = x + i0.0

real :: x, y \rightarrow cmplx(x,y) = x + iy

complex :: z \rightarrow cmplx(Z) = Re(z) + iIm(z)
```

```
integer :: i = 42
real :: x = 3.14
complex :: z

z = cmplx(i, x)
write(*,*) z, cmplx(x)
end program test_cmplx
```





• Funciones numéricas. Truncamiento y redondeo

X	aint(x)	anint(x)	int(x)	nint(x)
±5.0	\pm 5.0	\pm 5.0	± 5	± 5
\pm 5.1	\pm 5.0	\pm 5.0	± 5	± 5
\pm 5.2	\pm 5.0	\pm 5.0	± 5	±5
\pm 5.3	\pm 5.0	\pm 5.0	± 5	±5
\pm 5.4	\pm 5.0	\pm 5.0	± 5	± 5
\pm 5.5	\pm 5.0	\pm 6.0	± 5	± 6
\pm 5.6	\pm 5.0	\pm 6.0	± 5	± 6
\pm 5.7	\pm 5.0	\pm 6.0	± 5	± 6
\pm 5.8	\pm 5.0	\pm 6.0	± 5	± 6
\pm 5.9	\pm 5.0	\pm 6.0	\pm 5	±6



• Funciones numéricas. Matemáticas

sqrt(x)	log(x)
conjg(z)	log10(x)
$\max(x1, x2, \ldots)$	cos(x)
min(x1,x2,)	sin(x)
exp(x)	tan(x)

$$\begin{aligned} & \operatorname{acos}(\mathbf{x}) & 0 \leq \arccos(\mathbf{x}) \leq \pi \\ & \operatorname{asin}(\mathbf{x}) & -\pi/2 \leq \arcsin(\mathbf{x}) \leq \pi/2 \\ & \operatorname{atan}(\mathbf{x}) & -\pi/2 \leq \arctan(\mathbf{x}) \leq \pi/2 \\ & \operatorname{atan2}(\mathbf{x},\mathbf{y}) & -\pi < \arctan(\mathbf{y}/\mathbf{x}) \leq \pi \end{aligned}$$



Funciones numéricas. Matemáticas

•
$$abs(x)$$

• $Si x es real abs(x) = \begin{bmatrix} x & si x > = 0 \\ -x & si x < 0 \end{bmatrix}$

• Si x es complejo abs(x)=
$$\sqrt{X_r^2 + X_i^2}$$

- mod(x,y)
 - Ambos x e y pueden ser reales o enteros

 mod(x,y) = x- int(x/y)*y



• Funciones numéricas. Matemáticas.

- epsilon(x)
 - Devuelve un número del mismo tipo y kind que x, que es despreciable frente a la unidad.

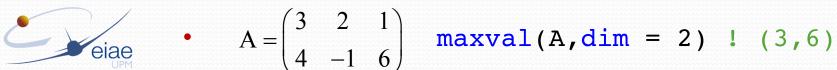
```
1.d0 \sim 1.d0 \pm epsilon(x)
```



- Funciones para arrays. Búsqueda
 - size(A,[dim=i]) (Los corchetes significan opcional)
 - Devuelve el tamaño de la dimensión i del array A
 - Ej.- size(V) devuelve el numero de elementos del vector V
 - Ej.- size(Matriz, dim=1) devuelve el número de filas del array Matriz
 - Ej.- size(Matriz, dim=2) devuelve el número de columnas del array Matriz



- Funciones para arrays. Búsqueda
 - maxval(Array)/minval(Array)
 - Devuelve el mayor/menor elemento del array.
 - maxval(Matriz,dim = i)/minval(Matriz,dim = i)
 - i=1 Devuelve un vector cuyos elementos son el máximo de cada una de las columnas.
 - i=2 Devuelve un vector cuyos elementos son el máximo de cada una de las filas.
 - Ej.-





- Funciones para arrays. Búsqueda
 - maxloc(Array)/minloc(Array)
 - Devuelve la posición (no el índice) del mayor/menor elemento del array.

• Ej.
$$V = (3 -1 2) \text{ minloc}(V) ! 2$$

• Ej.
$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 4 & -1 & 6 \end{pmatrix}$$
 maxloc(A) ! (2,3)

• Ej.
$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & -1 \\ 4 & -1 & 6 \end{pmatrix}$$
 minloc(A) ! (2,2)



- Funciones para arrays. Matemáticas
 - transpose(A)
 - Devuelve la matriz transpuesta.

• Ej.-
$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 4 & -1 & 6 \end{pmatrix}$$

• B = transpose(A)
$$B = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & -1 \\ -1 & 6 \end{pmatrix}$$



- Funciones para arrays. Matemáticas
 - dot_product(vector_1, vector_2)
 - Devuelve el producto escalar de los dos vectores.
 - matmul(A,B)
 - Devuelve el producto de dos matrices(arrays) con formas compatibles.



end program producto

```
program producto
integer :: V(3), U(3)
integer :: A(3,2), B(2,3), C(3,3)
integer :: i,j
A = 0
B = 0
do i = 1,2
  A(i,i) = 1
    do j = 1,3
          B(i,j) = j
    enddo
enddo
C = matmul(A,B)
do j = 1,3
   write(*,*) C(j,:)
enddo
```

```
program producto
```

```
integer :: V(3), U(3)
integer :: A(3,2), B(2,3), C(3,3)
integer :: i,j
A = 0
B = 0
do i = 1,2
  A(i,i) = 1
   do j = 1,3
         B(i,j) = j
   enddo
enddo
C = matmul(A,B)
do j = 1,3
   write(*,*) C(j,:)
enddo
```

end program producto

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

```
program producto
integer :: V(2), U(3)
integer :: A(3,2)
integer :: i
do i = 1,3
 U(i) = i
enddo
A = 1
V = matmul(U,A)
write(*,*) V
end program producto
```



```
program producto
integer :: V(2), U(3)
integer :: A(3,2)
                                    \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}
integer :: i
do i = 1,3
   U(i) = i
enddo
                                                V = \begin{pmatrix} 6 & 6 \end{pmatrix}
A = 1
V = matmul(U,A)
write(*,*) V
end program producto
```



• Funciones para Character.

```
• len(string)
```

- Devuelve la longitud del string (cadena).
- Ej.- len(' Fortran & magic ') = 20
- trim(string)
 - Devuelve el mismo string quitando los espacios en blanco a la derecha del mismo.
 - Ej.- trim (' Fortran & magic ') =
 ' Fortran & magic'



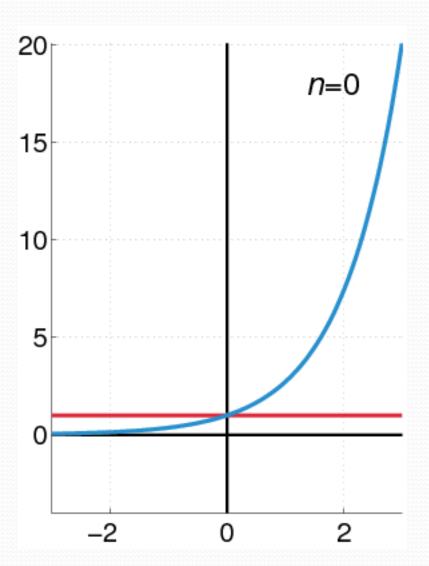
Antes:

- Dudas sobre el examen:
 - Ecuación de segundo grado
 - Sumatorios
 - Vectores
- Clase de hoy:
 - Funciones intrínsecas
 - Ejercicio polinomio de Taylor
 - Matemáticas
 - Programación



Caso de aplicación:

Serie de Taylor de una función.





Buscamos el polinomio que "más se parece" a una función en el entorno del punto x = 0

$$f(x) \approx P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots + a_N x^N = \sum_{i=0}^N a_i x^i$$

Que "se parezcan" implica que al menos su valor sea el mismo en x = 0:

$$f(0) = P(0) = a_0 \Rightarrow P(x) = f(0)$$
 Polinomio aproximador de orden 1.



Buscamos el polinomio que "más se parece" a una función en el entorno del punto x = 0

$$f(x) \approx P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots + a_N x^N = \sum_{i=0}^N a_i x^i$$

Que "se parezcan" implica que al menos su valor sea el mismo en x = 0:

$$f(0) = P(0) = a_0 \Rightarrow P(x) = f(0)$$
 Polinomio aproximador de orden 0.

Ejemplo:

$$f(x) = \frac{1}{1 - x} \longrightarrow \partial P(x)?$$

Orden 0:

$$f(0)=1 \Rightarrow P(x)=1$$

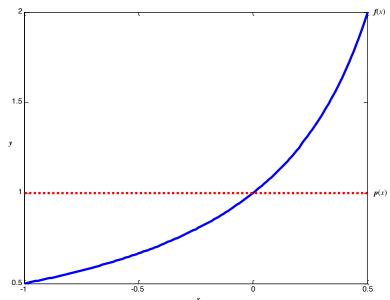


Ejemplo:

$$f(x) = \frac{1}{1-x} \rightarrow iP(x)$$
?

Orden 1:

$$f(0)=1 \Rightarrow P(x)=1$$



Que "se parezcan" implica que su pendiente (crecimiento) también coincida en x = 0:

$$f'(0) = P'(0) = a_1 \Rightarrow (ya \text{ sabiamos que } a_0 = f(0))$$

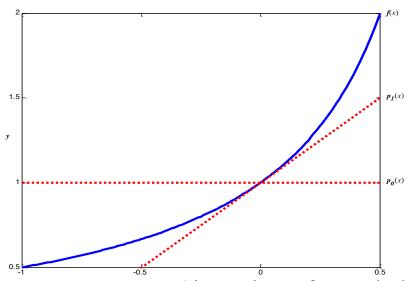
$$\Rightarrow P(x) = f(0) + f'(0)x$$

Volviendo al ejemplo:
$$f'(x) = \frac{1}{(1-x)^2}$$
 $\rightarrow a_1 = f'(0) = 1$



Orden 1:

$$P(x) = 1 + x$$



Orden 1:

$$P(x) = 1 + x$$

Si's eguimos forzando la igualdad en derivadas sucesivas en x = 0:

$$f''(0) = P''(0) = 2 \cdot a_2 \to a_2 = \frac{f''(0)}{2}$$

$$f'''(0) = P'''(0) = 3 \cdot 2 \cdot a_3 \to a_3 = \frac{f'''(0)}{3!}$$

$$f''''(0) = P''''(0) = 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot a_4 \to a_4 = \frac{f'''(0)}{4!}$$

.

$$f^{n}(0) = P^{n}(0) = n \cdot n - 1 \cdot \dots \cdot 3 \cdot 2 \cdot a_{n} \to a_{n} = \frac{f^{n}(0)}{n!}$$



$$f(x) \approx P(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f'''(0)}{3!}x^3 + \dots + \frac{f^N(0)}{N!}x^N = \sum_{i=0}^{N} \frac{f^i(0)}{i!}x^i$$

En nuestro caso particular de $f(x) = \frac{1}{1-x}$ en un entorno de x = 0

$$f''(x) = \frac{2(1-x)}{(1-x)^4} = \frac{2}{(1-x)^3} \Rightarrow f''(0) = 2$$

$$f'''(x) = \frac{3 \cdot 2 \cdot (1-x)^2}{(1-x)^6} = \frac{3 \cdot 2}{(1-x)^4} \Rightarrow f'''(0) = 3 \cdot 2$$

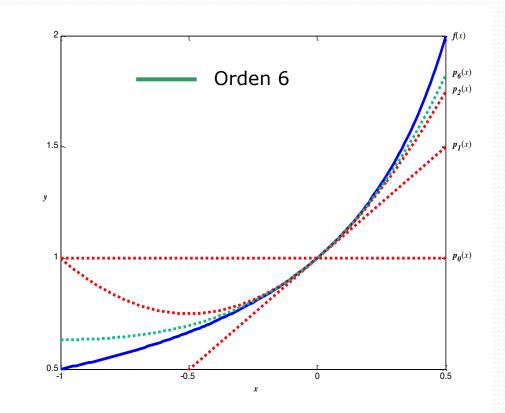
$$\vdots$$

$$f'^n(x) = \frac{4 \cdot 3 \cdot 2}{(1-x)^{n+1}} \Rightarrow f'^n(0) = n!$$

$$f(x) = \frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{n!} x^n = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$$

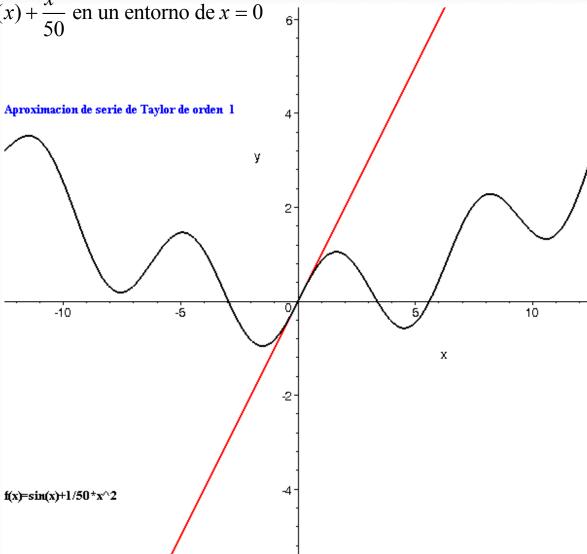
$$f(x) \approx P(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f'''(0)}{3!}x^3 + \dots + \frac{f^N(0)}{N!}x^N = \sum_{i=0}^N \frac{f^i(0)}{i!}x^i$$

En nuestro caso particular:
$$f(x) = \frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{n!} x^n = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$$



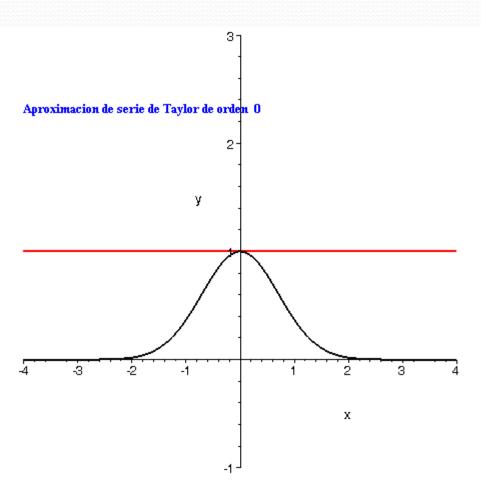


Algunos ejemplos $f(x) = sen(x) + \frac{x^2}{50}$ en un entorno de x = 0





$$f(x) = e^{-x^2}$$
 en un entorno de $x = 0$





 $f(x) = \exp(-x^2)$ 32

Buscamos el polinomio que "más se parece" a una función en el entorno del punto x = 0

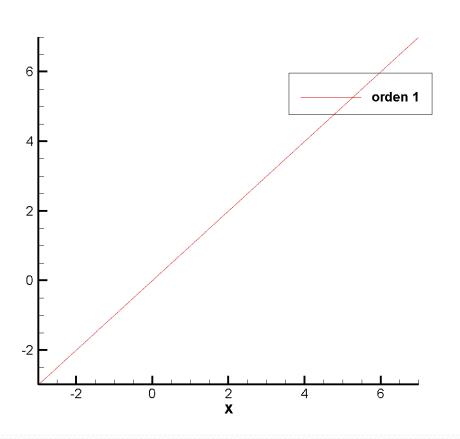
$$f(x) = Ln(1+x) \approx Sn(x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} \dots + (-1)^{n+1} \frac{x^n}{n} + \dots = \sum_{i=0}^{N} (-1)^{i+1} \frac{x^i}{i}$$

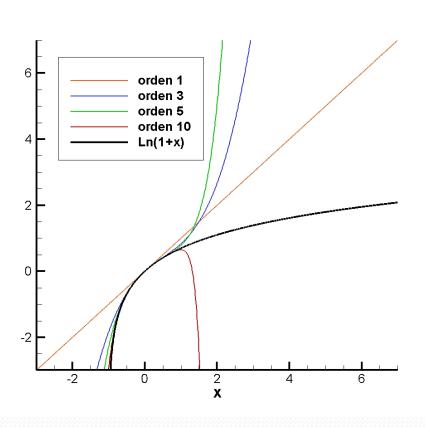
```
Sn = 0.d0
do i = 1,n
Sn = Sn + ((-1)**(i+1)) * ((x**i)/(1.d0*i))
enddo
!Sn almacena el valor del polinomio de grado n en x
error = abs(log(1.d0+x)-Sn)
```



```
do n = 1, 15
   Sn = 0.d0
   do i = 1, n
       Sn = Sn + ((-1)**(i+1)) * ((x**i)/(1.d0*i))
   enddo
   !Sn almacena el valor del polinomio de grado n en x
   error = abs(log(1.d0+x)-Sn)
   write(*,*) 'Orden: ',n, 'error: ',error
enddo
```



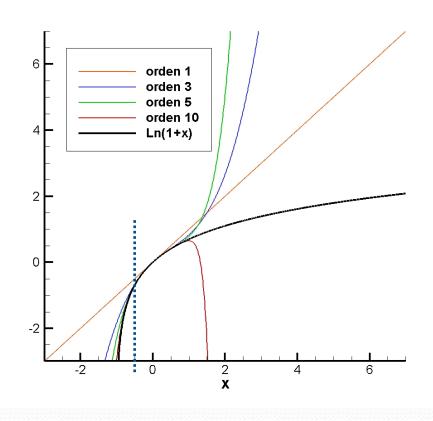






ERROR ENTRE Ln(-0.5) y P(-0.5)

Orden 1	0.193147180560E-00
Orden 2	6.814718055995E-02
Orden 3	2.648051389328E-02
Orden 4	1.085551389328E-02
Orden 5	4.605513893279E-03
Orden 6	2.001347226612E-03
Orden 7	8.852757980407E-04
Orden 8	3.969945480407E-04
Orden 9	1.799806591518E-04
Orden 10	8.232440915181E-05
Orden 11	3.793520460640E-05
Orden 12	1.759015252303E-05
Orden 13	8.200128484593E-06
Orden 14	3.840474466689E-06
Orden 15	1.805969258385E-06
Orden 16	8.522949419786E-07
Orden 17	4.035070283691E-07
Orden 18	1.915794024764E-07
Orden 19	9.119263235757E-08
Orden 20	4.350891649285E-08





Volviendo a la notación compacta:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N} a_k x^k$$
 $a_n = \frac{f^{(n)}(0)}{n!}$

Hay funciones cuyos desarrollos pueden escribirse de forma compacta

$$\sin x = \sum_{n=0}^{\infty} rac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1} \qquad \qquad = x - rac{x^3}{6} + rac{x^5}{120} - \cdots \qquad \qquad ext{for all } x$$

$$\cos x = \sum_{n=0}^{\infty} rac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} = 1 - rac{x^2}{2} + rac{x^4}{24} - \cdots \qquad \qquad ext{for all } x$$



Escribir un programa (versión básica) que:

- Pida por pantalla un entero N y un real x
- Calcule N términos a_n del desarrollo de Taylor de la función sin(x)
- Evalúe el desarrollo de Taylor en el punto x
- Escriba por pantalla:
 - El el valor del desarrollo de Taylor en x.
 - El valor de la función en x.
 - El error cometido|Taylor(x)-sin(x)|

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n x^n$$
 $a_n = \frac{f^{(n)}(0)}{n!}$ $\sin x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1}$



Escribir un programa (versión avanzada) que:

- Pida por pantalla dos reales: x, tol y un entero: N.
- Calcule N términos a_n del desarrollo de Taylor de la función sin(x)
- Evalúe el desarrollo de Taylor en el punto x, usando el número de términos necesarios para que el error sea menor que tol
- Escriba por pantalla:
 - El el valor del desarrollo de Taylor en x.
 - El valor de la función en x.
 - El error cometido|Taylor(x)-sin(x)|
 - En caso de que el error cometido sea mayor que tol con el máximo número de términos (N), pedirle al usuario que utilice más términos.

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n x^n$$
 $a_n = \frac{f^{(n)}(0)}{n!}$ $\sin x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1}$



Serie de Taylor: PROGRAMACION (Aclaraciones)

Escribir un programa (versión básica) que:

- Pida por pantalla un entero N y un real x
- Evalúe el desarrollo de Taylor (p(x)) de la función sin(x) con N términos en el punto x
- Escriba por pantalla:
 - El valor del desarrollo de Taylor en x: p(x).
 - El valor de la función en x: sin(x).
 - El error cometido: |p(x)-sin(x)|

NOTA: el polinomio de Taylor centrado en x=0 de $f(x)=\sin(x)$ es

$$p(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n x^{2n+1}$$

donde los coeficientes a_n valen:

$$a_n = \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}$$



RESULTADOS:

```
N 1 x 1.00000000
p(x) 0.833333333
sin(x) 0.841470957
error 8.13764334E-03
N 2 x 1.00000000
p(x) 0.841666639
sin(x) 0.841470957
error 1.95682049E-04
N 3 x 1.00000000
p(x) 0.841468215
sin(x) 0.841470957
error 2.74181366E-06
```

Serie de Taylor: PROGRAMACION (Aclaraciones)

Escribir un programa (versión avanzada) que:

- Pida por pantalla dos reales: x, tol y un entero: N.
- Calcule N términos a_n del desarrollo de Taylor de la función sin(x) y los almacene en un vector de tamaño N.
- Evalúe el desarrollo de Taylor en el punto x, usando el número de términos necesarios para que el error sea menor que tol
- Escriba por pantalla:
 - El el valor del desarrollo de Taylor en x.
 - El valor de la función en x.
 - El error cometido|Taylor(x)-sin(x)|
 - En caso de que el error cometido sea mayor que tol con el máximo número de términos (N), pedirle al usuario que utilice más términos.
 RESULTADOS:

NOTA: el polinomio de Taylor centrado en x=0 de $f(x)=\sin(x)$ es

$$p(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n x^{2n+1}$$

donde los coeficientes a_n valen:

eiae
$$a_n = \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}$$

```
p(x) 0.833333313

sin(x) 0.841470957

error 8.13764334E-03

N 2 x 1.000000000

p(x) 0.841666639

sin(x) 0.841470957

error 1.95682049E-04

N 3 x 1.000000000

p(x) 0.841468215

sin(x) 0.841470957
```

1.000000000

Serie de Taylor: PROGRAMACION (Aclaraciones)

Comentarios adicionales:

- Si el cálculo del factorial os devuelve un número negativo, es posible que estéis teniendo problemas de <u>overflow</u> (no hay memoria suficiente reservada para almacenar un entero tan grande).
- Este problema podéis resolverlo almacenando el resultado del factorial en una variable de tipo real.
- Si queréis precisión adicional, es recomendable utilizar variables de doble precisión [real(8)].
- En el programa final, debería ser sencillo cambiar el desarrollo de Taylor para que calcule el de otra función. Por ejemplo, el desarrollo del coseno centrado en x=0 es:

$$p(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n x^{2n} \qquad a_n = \frac{(-1)^n}{(2n)!}$$

